

Table 4. Rosseland mean opacity computed for aluminium plasma at 1 g/cc density and different temperatures. Table is taken from Ref. [5].

T(eV)	500	750	1000	1250
TF	40.5	9.09	2.09	0.83
OPAL	59.3		2.13	
HOPE	53.1		1.92	
THERMOS	46.1	10.3	2.14	0.83
ATMED	45.02	10.32	2.23	0.85
OPAQS	32.04	13.26	2.65	0.97
EXPERIMENTAL	51±8	13±2	2.9±0.4	1.1±0.2

free contributions which strongly need bound electrons for their absorption. The free-free absorption occurs in the field of ions and has very small probability at high temperatures. The only remaining process is scattering which gives a small constant contribution to opacity. Thus all the major contributing processes to opacity become small and the overall effect of increasing the temperature results in decreasing the opacity [20].

Conclusions

In this work, we have presented a new opacity code OPAQS, based on average atom model under LTE condition for single element. OPAQS is capable of calculating occupation number, average charge state and mean and group opacities. Our code gives adequate values of charge state and mean opacities, being competitive with results from more sophisticated model LEDCOP. Effects of different line broadenings have also been studied.

References

1. Nikiforov A.F., Novikov V.G. and Solomyannaya A.D. // Laser and Particle Beams. 1996. V. 14. P. 765.
2. Quantum-statistical models of hot dense matter, Nikiforov A.F. et. Al. Basel. Birkhäuser Verlag, 2005.
3. Rickert A., and Meyer-Ter-Vehn J. // Laser and Particle Beams. 1990. V. 8. P. 715.
4. Rubiano J. G. and Florido R. et al. // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. 2004. V. 83. P. 159.
5. Mendoza M. A. et al. // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. 2014. V. 140. P. 81.
6. Bailey J. E. and Nagayama T. et al. // Nature. 2015. V. 517. P. 56.
7. Madhusmita Das, Srivastava M. K. and Menon S. V. G. // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. 2012. V. 143. P. 286.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФфуЗИИ В ПРИПОВЕРХНОСТНОМ СЛОЕ КРЕМНИЯ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ИМПУЛЬСНОГО МОЩНОГО ИОННОГО ПУЧКА

Н.Е. Актаев, Г.Е. Ремнев

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
пр. Ленина, 30, Томск, 634050, Россия, nurkenaktaev@gmail.com, remnev06@mail.ru

В работе изучается импульсное воздействие мощного ионного пучка на кремниевую мишень. Показано, что в результате этого воздействия формируется большой температурный градиент в приповерхностной области мишени, вызывающий диффузию атомов углерода, адсорбированного на кремниевой поверхности. Установлено, что значение концентрации диффундирующего углерода вглубь мишени на несколько порядков превосходит типичное значение концентрации, характерное для имплантированных ионов.

Введение

Воздействие импульсных мощных ионных пучков (МИП) [1] на материалы представляет интерес как для исследований в области инерциального термоядерного синтеза [2] и поведения материалов при экстремальных воздействиях, так и с точки зрения модифицирования материалов [3-5]. Изменяя величину потока энергии в МИП, можно реализовывать различные режимы обработки материалов: с формированием абляционной плазмы, с оплавлением поверхности и без оплавления поверхности при потоке энергии менее 10^7 Вт/см² [4]. Последний случай – это режим короткоимпульсной имплантации, который сопровождается одновременным отжигом дефектов, создаваемых имплантируемыми ионами. Этот режим реализуется при определенной величине потока энергии, числе импульсов и скважности [4,

6]. Действие МИП в режиме короткоимпульсной имплантации сопровождается быстрым нагревом и остыванием материала мишени. В работе [7] использовался импульсный ионный пучок для отжига дефектов, формируемых при имплантации. Варьируемое число последовательных импульсов может в значительной степени изменять профиль распределения примесных атомов и дефектов. В качестве примесных атомов рассматриваются атомы углерода, адсорбируемые на поверхности образцов при не очень высоком вакууме ($\sim 10^{-4}$ Торр) и диффундирующие вглубь образца. Исследованию режима формирования концентрационного профиля углерода при воздействии определенного числа импульсов тока мощного ионного пучка посвящена данная статья.

Основная часть

Для анализа диффузионного процесса была разработана расчетная модель, включающая расчет нагрева мишени из кремния и диффузионные процессы переноса углерода в поверхностном слое мишени при остывании мишени. Значения входных параметров модели выбирались наиболее близкими к параметрам ускорителя ТЭМП-4 [8]: ускоряющее напряжение $E_0 = 240$ кэВ, длительность импульса на полувывоте $t_{beam} = 100$ нс, пауза между импульсами 8 с, максимальное число импульсов 600, плотность энергии на мишени $0.2-0.3$ Дж/см² (соответствующая плотность тока $j_{beam} = 15-20$ А/см²), интегральная имплантационная доза за 600 импульсов $N_{dose} = 1.2 \cdot 10^{15}$ см⁻², рабочее давление в газовой камере 0.6 Па.

Нагрев мишени. При импульсном воздействии МИП на кремниевую мишень эволюция температурного поля $T(x, t)$ по глубине x определяется в рамках решения задачи Стефана:

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \frac{\lambda}{c_p \rho_m} \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} + \frac{j_{beam}(t)}{e} [Q_n(x) + Q_e(x)] \quad (1)$$

где λ – коэффициент теплопроводности, c_p – удельная теплоёмкость, ρ_m – плотность массы кремния, e – заряд электрона, $j_{beam}(t)$ – плотность тока в импульсе, $Q_n(x)$ и $Q_e(x)$ удельные потери энергии на ядерное и электронное торможения соответственно.

Рассчитанный температурный профиль после окончания воздействия одного импульса тока пучка представлен на рис. 1.

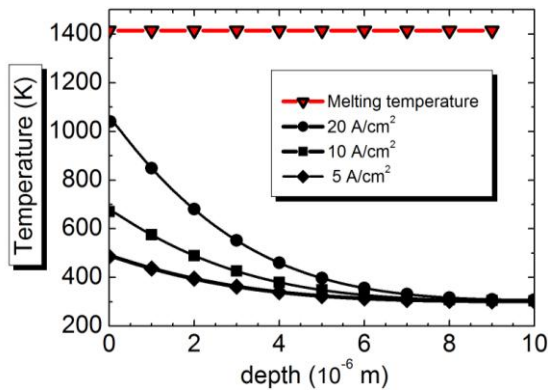


Рис. 1. Распределение температуры по глубине кремниевой мишени при различных значениях плотности тока МИП.

Плотности тока 20 А/см² отвечает кривая, наиболее близкая к экспериментальной (диапазон плотности тока пучка на ТЭМП-4 – 15-20 А/см²). Кривые при 10 и 5 А/см² приведены для сравнения. Горизонтальная линия с треугольниками показывает температуру плавления кремния. Разность между температурой плавления и температурой создаваемой на поверхности крем-

ниевго образца МИП приблизительно 400 К, следовательно, при моделировании массопереноса углерода процессами плавления можно пренебречь. Этот факт также исключает перемещение поверхностного слоя с адсорбированным слоем.

С течением времени в паузе между импульсами происходит остывание мишени и снижение температуры поверхностного слоя мишени. Высокий градиент температуры в поверхностном слое ($\sim 10^6$ К/см) способствует диффузии адсорбированного углерода с поверхности вглубь материала мишени.

Диффузия и остывание. Диффузия углерода с поверхности в мишень при воздействии МИП описывается соотношением:

$$\frac{\partial N(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ D[T_{cd}(x, t)] \frac{\partial N(x, t)}{\partial x} \right\}, \quad (2)$$

где $N(x, t)$ – концентрация ионов углерода по глубине x в момент времени t . Поскольку кремний представляет собой кубический кристалл, то коэффициент диффузии D – есть величина скалярная, а не тензор второго ранга, т.е.

$$D[T_{cd}(x, t)] = \frac{\omega(r) a_{lat}^2}{2} \exp \left[-\frac{E_{diff}}{k_B T_{cd}(x, t)} \right], \quad (3)$$

где a_{lat} – постоянная решетки углерода, k_B – постоянная Больцмана. Энергия активации диффузии $E_{diff} = 2.18$ эВ определялась, как разница между экстремумами потенциальной энергии $W(\vec{r})$, заданной потенциалом Терсоффа [9]. Собственная частота колебания атомов в решетке оценивалась как $\omega(\vec{r}) \approx \left[\tilde{m}^{-1} \frac{d^2 W}{d\vec{r}^2} \right]^{1/2}$, где \tilde{m} – обобщенная масса системы "атом-решётка".

Коэффициент диффузии в нашем случае является функционалом от температуры $T_{cd}(x, t)$, которая характеризует остывание за время 8 сек, согласно эксперименту

$$T_{cd}(0, t) = T_0 + (T_{ini} - T_0) \exp \left(-\frac{\lambda}{c_p \rho_m d_{si}^2} t \right), \quad (4)$$

где T_{ini} – температура поверхности образца после окончания воздействия МИП, $d_{si} = 400$ мкм – толщина кремниевго образца, а $T_0 = 300$ К – температура окружающей среды. Остывание кремниевго образца описывается уравнением теплопроводности:

$$\frac{\partial T_{cd}(x, t)}{\partial t} = \frac{\lambda}{c_p \rho_m} \frac{\partial^2 T_{cd}(x, t)}{\partial x^2}. \quad (5)$$

В результате моделирования диффузии адсорбированных на поверхности атомов углерода

получен соответствующий концентрационный профиль (диффузионный профиль). На рис. 2 показано сравнение диффузионного профиля (открытые круглые символы) с имплантационным (сплошная линия). Численные значения профилей нормированы на значение концентрации аморфного углерода $N_{\text{amorf}} = 1.1 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$.

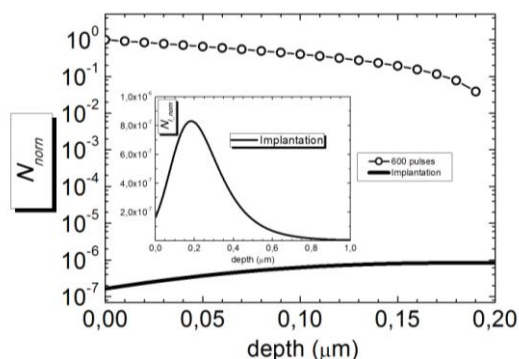


Рис. 2. Распределение концентрации углерода по глубине кремниевой мишени. Диффузионный профиль – круглые символы, имплантационный профиль – линия. Встроенный график соответствует имплантационному профилю в более широком диапазоне координаты x .

Как видно из рисунка, разница между значениями концентрации диффузионного и имплантационного профилей более чем три порядка. Таким образом, можно сделать вывод о том, что при короткоимпульсной имплантации ключевую роль в насыщении приповерхностного слоя кремниевой мишени играет диффузия адсорбированного на поверхности углерода.

Заключение

Изучено влияние короткоимпульсного воздействия мощным ионным пучком на кремниевую мишень. Выявлено, что в режиме короткоимпульсной имплантации углерода формируется высокий температурный градиент, вызывающий диффузию адсорбированного на поверхности углерода вглубь кремниевой мишени. Показано, что значение концентрации углерода в приповерхностном слое в результате диффузии более чем на три порядка превосходит ожидаемое значение концентрации при учете только механизма ионной имплантации.

Список литературы

1. Быстрицкий В.М., Диденко А.Н. Мощные ионные пучки. М.: Энергоатомиздат, 1984. 152 с.
2. Winterberg F. // Phys. Rev. 1968. V. 174. P. 212.
3. Neri J.M., Hammer D.A., Ginot G., Sudan R.N. // Appl. Phys. Lett. 1980. V. 37. P. 101.
4. Davis H.A., Remnev G.E., Stinnett R.W., Yatsui K. // MRS Bull. 1996. V. 21. P. 58.
5. Remnev G.E., Uglov V.V., Shimanski V.I., Pavlov S.K., Kuleshov A.K. // Appl. Surf. Science. 2014. V. 310. P. 204.
6. Ремнев Г.Е., Иванов Ю.Ф., Опекунов М.С., Пузыревич А.Г. // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21. С. 60.
7. Bayazitov R.M., Khaibullin I.B., Batalov R.I., Nurutdinov R.M., Antonova L.Kh., Aksenov V.P., Mikhailova G.N. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B 2003. V. 206. P. 984.
8. Remnev G.E., Isakov I.F., Opekounov M.S., Kotlyarevsky G.I., Kutuzov V.L., Lopatin V.S., Matvienko V.M., Ovsyannikov M.Yu., Potyomkin A.V., Tarbakov V.A. // Surf. and Coat. Tech. 1997. V. 96. P. 103.
9. Tersoff J. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. P. 6991.

MODELLING OF DIFFUSION IN PRESURFACE SILICON LAYER UNDER THE ACTION OF PULSED HIGH-INTENSITY ION BEAM

Nurken E. Aktaev, Gennady E. Remnev

National Research Tomsk Polytechnic University,

Lenina Avenue, 30, 634050, Tomsk, Russia, nurkenaktaev@gmail.com, remnev06@mail.ru

The influence of the pulsed high-intensity ion beam on the silicon is studied by use the developed theoretical model. The input parameters of the model were the settings of the experimental setup of the TEMP-4. It is shown, that at the short-pulsed implantation regime of the TEMP-4 the silicon surface does not melt. However, the regime leads to the high temperature gradient which promotes the diffusion process from the surface into the depth the silicon simple. The diffused particles are the carbon atoms adsorbed on the silicon surface by the various cases. Thus, it is shown that the carbon atom diffused from the surface make the main contribution to the forming of the concentration profile. The concentration of the implanted carbon ions less more then tree orders compared with the concentration of the diffused carbon atoms.